КАЗАНСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ

Кафедра теоретической физики

С.И. Белов, А.С. Кутузов

ТЕОРИЯ СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ

Казань – 2015

УДК 537.6(07)
ББК 22.334
Б43

Принято на заседании кафедры теоретической физики
Протокол № 10 от 8 мая 2015 года

Рецензент –
доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой
физики твердого тела КФУ, профессор **Л.Р. Тагиров**,

Белов С.И.
Б43 **Теория сильнокоррелированных систем** / С.И. Белов, А.С. Кутузов. – Казань: Казан. ун-т, 2015. – 25 с. Издание второе, переработанное и дополненное.

Учебно-методическое пособие содержит краткие сведения по теории сильнокоррелированных электронных систем. Рассмотрены следующие основные вопросы: модель Хаббарда в предельных случаях слабого и сильного кулоновского взаимодействия и в приближении самосогласованного поля, нелинейная сигма-модель на примере одномерного и двумерного антиферромагнетика, теория фрустрированных двумерных антиферромагнетиков, основанная на гипотезе резонирующих валентных связей. Второе издание дополнено разделом, в котором рассматривается формализм интегрирования по траекториям для спиновых систем. Более подробно изложена теория топологических возбуждений в двумерных классических магнетиках.

Учебно-методическое пособие предназначено для магистрантов Института физики Казанского федерального университета.

СОДЕРЖАНИЕ

1. МОДЕЛЬ ХАББАРДА

Наиболее распространенной моделью для исследования магнетизма коллективизированных электронов является модель Хаббарда, учитывающая лишь кинетическую энергию электронов и их кулоновское взаимодействие на одном узле. Гамильтониан этой модели имеет вид [1]

$$H = -t\sum_{i,\delta,\sigma} c_{i\sigma}^{+} c_{i+\delta,\sigma} + U\sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu\sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} . \qquad (1.1)$$

Здесь t – интеграл переноса с узла на узел, U – энергия кулоновского отталкивания на узле, n_i – оператор числа электронов на узле i, который может быть выражен через операторы рождения $c_{i\sigma}^{+}$ и уничтожения $c_{i\sigma}$ электрона на узле i с проекцией спина $\sigma = \uparrow,\downarrow$: $n_i = \sum_{\sigma} n_{i\sigma}$, $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^{+} c_{i\sigma}$, δ – вектор, соединяющий ближайшие узлы. Слагаемое с химическим потенциалом μ необходимо для учета постоянства числа электронов в системе.

Эта простейшая модель, в которой игнорируется вырождение электронных состояний и пренебрегается взаимодействием электронов на соседних узлах, оказывается чрезвычайно содержательной и помогает понять, в частности, эффекты взаимодействия спиновых и зарядовых степеней свободы в металле. В зависимости от соотношения между параметрами t и U можно использовать различные приближения, позволяющие упростить решение задачи.

1.1 Слабое кулоновское отталкивание

В случае $U << t$ имеем теорию возмущений, в которой кулоновское взаимодействие формирует H_{int}. Гамильтониан кинетической энергии рассматривается в качестве гамильтониана H_0, причем он диагонализуется путем фурье-преобразования электронных операторов:

$$\begin{aligned} c_{i\sigma} &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{kr}) c_{\mathbf{k}\sigma}, \\ c_{i\sigma}^{+} &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \exp(-i\mathbf{kr}) c_{\mathbf{k}\sigma}^{+} \end{aligned} \qquad (1.2)$$

где N – число узлов в кристалле. Таким образом,

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c^+_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}, \\ \varepsilon_{\mathbf{k}} = -t \sum_{\boldsymbol{\delta}} \exp(i\mathbf{k}\boldsymbol{\delta}), \tag{1.3}$$

$$H_{\text{int}} = \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{q}_1,\mathbf{q}_2} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}_2) c^+_{\mathbf{k}_1\uparrow} c^+_{\mathbf{k}_2\downarrow} c_{\mathbf{q}_1\downarrow} c_{\mathbf{q}_2\uparrow}. \tag{1.4}$$

Здесь символ δ означает дельта-функцию Дирака.

1.2 Большое кулоновское отталкивание

В пределе $U >> t$ в качестве H_0 следует выбрать одноузельную энергию, а кинетическую энергию необходимо рассматривать как возмущение:

$$H_0 = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_i (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}), \tag{1.5}$$

$$H_{\text{int}} = -t \sum_{i,\delta,\sigma} c^+_{i\sigma} c_{i+\delta,\sigma}. \tag{1.6}$$

Таким образом, задача должна решаться в узельном представлении, где H_0 диагонален в пространстве локализованных на данном узле четырех состояний:

$$|0\rangle,\ |\uparrow\rangle,\ |\downarrow\rangle,\ |\uparrow\downarrow\rangle. \tag{1.7}$$

1.3 Метод самосогласованного поля

В промежуточном случае $U \sim t$ при дополнительном предположении о малости флуктуаций операторов числа частиц двухчастичный кулоновский оператор можно свести к одночастичному путем следующей замены:

$$n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \to n_{i\uparrow} < n_{i\downarrow} > + < n_{i\uparrow} > n_{i\downarrow}, \tag{1.8}$$

где <…> означает статистическое усреднение. Точный гамильтониан Хаббарда (1.1) в этом случае сводится к гамильтониану невзаимодействующих электронов, движущихся в поле, создаваемом другими электронами:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} c^+_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}, \tag{1.9}$$

$$\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \frac{1}{2}\sigma\Delta - \tilde{\mu}, \tag{1.10}$$

где $\tilde{\mu}$ – эффективный химпотенциал, а Δ – спиновое расщепление электронной зоны: $\tilde{\mu} = \mu - \frac{1}{2}nU$, $\Delta = U(<n_\uparrow> - <n_\downarrow>)$. Значения $\tilde{\mu}$ и Δ должны находиться из уравнений самосогласования:

$$\begin{aligned} \Delta &= U\sum_{\mathbf{k},\sigma} \sigma f(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}), \\ n &= \sum_{\mathbf{k},\sigma} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}), \end{aligned} \qquad (1.11)$$

где

$$f(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}) = <c^+_{\mathbf{k}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}> = \frac{1}{\exp(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}/T) + 1},$$

$n = <n_\uparrow> + <n_\downarrow> = N_e / N$, N_e – число электронов в системе.

Метод самосогласованного поля позволяет сделать важное заключение, что при $U \sim t$ в системе возможно возникновение ферромагнитной фазы. Следует отметить, что полученные результаты носят качественный характер, поскольку сама процедура приближения не имеет строгого обоснования.

2. ИНТЕГРАЛЫ ПО ТРАЕКТОРИЯМ ДЛЯ СПИНОВЫХ СИСТЕМ

2.1 Формализм интегрирования по траекториям

Некоторые вопросы физики магнитных систем удобнее изучать, используя формализм интегрирования по траекториям (в отличие от стандартного гамильтонова формализма). Как известно, для системы, описываемой гамильтонианом H статистическая сумма может быть представлена в виде

$$Z = \mathrm{Sp}\left[\exp(-\beta H)\right], \tag{2.1}$$

где $\beta = 1/T$ – обратная температура. Поставим задачу записать статистическую сумму Z в виде функционального интеграла по некоторым пока неопределенным векторным полям $\mathbf{n}$:

$$Z = \sum_{\mathbf{n}} \exp(-S)\,. \tag{2.2}$$

Величина S в этом выражении называется действием системы (постоянная Планка $\hbar$ здесь и далее во всем тексте полагается равной 1).

Рассмотрим вначале простейшую систему, состоящую из одного спина s с гамильтонианом H [2], тогда

$$Z = \sum_{m=-s}^{s} \left\langle sm \right| \exp(-\beta H) \left| sm \right\rangle, \tag{2.3}$$

где $\left| sm \right\rangle$ представляют собой собственные функции проекции момента на ось z:

$$\begin{gathered} S^z \left| sm \right\rangle = m \left| sm \right\rangle, \\ \mathbf{S}^2 \left| sm \right\rangle = s(s+1) \left| sm \right\rangle, \\ m = -s, \ldots, s. \end{gathered} \tag{2.4}$$

В дальнейшем функцию $\left| ss \right\rangle$, соответствующую максимальной проекции спина, будем обозначать символом $\left| 0 \right\rangle$, направление оси z – вектором $\mathbf{n}_0$.

Определим функцию $\left| \mathbf{n} \right\rangle$, сделав поворот оси квантования, задаваемый двумя сферическими углами θ и φ:

$$\left| \mathbf{n} \right\rangle = \exp\left[i\theta(\mathbf{eS}) \right] \left| 0 \right\rangle, \tag{2.5}$$

где

$$\mathbf{n} = (\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta),$$
$$\mathbf{e} = \frac{[\mathbf{n}\times\mathbf{n}_0]}{\left|[\mathbf{n}\times\mathbf{n}_0]\right|}. \tag{2.6}$$

Можно показать, что функции $|\mathbf{n}\rangle$ обладают следующими свойствами:

$$\langle\mathbf{n}|\mathbf{S}|\mathbf{n}\rangle = s\mathbf{n}, \tag{2.7}$$

$$\mathrm{Sp}(A) = \sum_{m=-s}^{s}\langle sm|A|sm\rangle = \sum_{\mathbf{n}}\langle\mathbf{n}|A|\mathbf{n}\rangle,$$
$$\sum_{\mathbf{n}} = \frac{2s+1}{4\pi}\int_0^{\pi}d\theta\sin\theta\int_0^{2\pi}d\varphi, \tag{2.8}$$

A – произвольный спиновый оператор,

$$\langle\mathbf{n}_1|\mathbf{n}_2\rangle = \left(\frac{1+\mathbf{n}_1\mathbf{n}_2}{2}\right)^s \exp\left[is\Phi(\mathbf{n}_0,\mathbf{n}_1,\mathbf{n}_2)\right]. \tag{2.9}$$

Здесь $\Phi(\mathbf{n}_0,\mathbf{n}_1,\mathbf{n}_2)$ представляет собой площадь сферического треугольника, вершины которого задаются векторами $\mathbf{n}_0, \mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2$.

Разобьем экспоненту в статистической сумме на произведение произвольного числа экспонент:

$$\exp(-\beta H) = \prod_{j=1}^{N_t}\exp(-\delta t H),$$
$$\delta t N_t = \beta. \tag{2.10}$$

Тогда статистическая сумма Z может быть переписана в виде

$$Z = \sum_{\{\mathbf{n}_j\}}\prod_{j=1}^{N_t}\langle\mathbf{n}_j|\exp(-\delta t H)|\mathbf{n}_{j+1}\rangle,$$
$$\mathbf{n}_{N_t+1} = \mathbf{n}_1, \tag{2.11}$$

где $\{\mathbf{n}_j\}$ означает суммирование по всем независимым переменным $\mathbf{n}_1,\mathbf{n}_2,\ldots,\mathbf{n}_{N_t}$. Выполним предельный переход $N_t\to\infty,\ \ \delta t\to 0$ (при этом $N_t\delta t = \beta = \mathrm{const}$) и будем рассматривать $\mathbf{n}$ как гладкую функцию параметра t: $\mathbf{n}_j\to\mathbf{n}(t),\ 0<t<\beta$. Условие $\mathbf{n}_{N_t+1} = \mathbf{n}_1$ переходит в $\mathbf{n}(t+\beta) = \mathbf{n}(t)$, то есть вектор $\mathbf{n}$ описывает замкнутую траекторию на поверхности единичной сферы.

Преобразуем выражение (2.11), разлагая экспоненту с точностью до первого порядка малости по δt:

$$\begin{gathered}\exp(-\delta tH)\approx 1-\delta tH,\\ \left\langle \mathbf{n}_j\left|\exp(-\delta tH)\right|\mathbf{n}_{j+1}\right\rangle \approx \left\langle \mathbf{n}_j\left|\mathbf{n}_{j+1}\right.\right\rangle - \delta t\left\langle \mathbf{n}_j\left|H\right|\mathbf{n}_{j+1}\right\rangle .\end{gathered} \tag{2.12}$$

Вычисляя матричные элементы в соответствии со свойством (2.9) и отбрасывая величины более высокого порядка малости, придем к следующему выражению для статистического интеграла:

$$Z_{\mathrm{E}} = \sum_{\{\mathbf{n}\}} \exp(-S_{\mathrm{E}}) . \tag{2.13}$$

Здесь

$$\begin{gathered}\sum_{\{\mathbf{n}\}} \ldots = \sum_{\mathbf{n}_1,\mathbf{n}_2,\ldots\mathbf{n}_{N_t}} \ldots\ ,\\ N_t \to \infty,\ \ \delta t \to 0,\end{gathered} \tag{2.14}$$

$$S_{\mathrm{E}} = -isS_{\mathrm{WZ}} + \int_0^{\beta} dt \left\langle \mathbf{n}(t)\left|H\right|\mathbf{n}(t)\right\rangle , \tag{2.15}$$

S_{WZ} представляет собой так называемое действие Wess-Zumino, или топологический член:

$$S_{\mathrm{WZ}} = \sum_{j=1}^{N_t=\infty} \Phi(\mathbf{n}_0,\mathbf{n}_j,\mathbf{n}_{j+1}) , \tag{2.16}$$

индекс «E» означает действие в евклидовом пространстве, переход от суммы к интегралу производится по обычному правилу: $\sum\limits_{j=1}^{N_t=\infty} \delta t \to \int\limits_0^{\beta} dt$.

Иногда бывает удобнее записать статистический интеграл в пространстве Минковского:

$$Z_{\mathrm{M}} = \mathrm{Sp}\left[\exp(iTH)\right] = \sum_{\{\mathbf{n}\}} \exp(iS_{\mathrm{M}}) . \tag{2.17}$$

Для перехода от S_{E} к S_{M} достаточно сделать формальную замену $\beta \to -iT$, $t \to -ix_0$, $0 < x_0 < T$, тогда

$$S_{\mathrm{M}} = sS_{\mathrm{WZ}} + \int_0^{T} dx_0 \left\langle \mathbf{n}(x_0)\left|H\right|\mathbf{n}(x_0)\right\rangle . \tag{2.18}$$

2.2 Топологический член

Введем дополнительный параметр τ, который вместе с параметром t задает положение вектора $\mathbf{n}$ в произвольной точке сферического треугольника, образованного векторами $\mathbf{n}_0, \mathbf{n}_j, \mathbf{n}_{j+1}$. Функция двух переменных $\mathbf{n} = \mathbf{n}(t,\tau)$ удовлетворяет следующим граничным условиям:

$$\begin{aligned} &\mathbf{n}(t,\tau=0) = \mathbf{n}(t), \\ &\mathbf{n}(t,\tau=1) = \mathbf{n}_0, \\ &\mathbf{n}(0,\tau) = \mathbf{n}(\beta,\tau). \end{aligned} \tag{2.19}$$

Площадь сферического треугольника может быть записана в виде интеграла

$$\Phi(\mathbf{n}_0,\mathbf{n}_j,\mathbf{n}_{j+1}) = \int\limits_{\tau=0}^{\tau=1} \delta S \,, \tag{2.20}$$

где $\delta S = \mathbf{n}[\partial_\tau \mathbf{n} \times \partial_t \mathbf{n}]\delta t \delta\tau$ – элемент площади сферического треугольника, $\partial_\tau = \dfrac{\partial}{\partial\tau}$, $\partial_t = \dfrac{\partial}{\partial t}$.

Далее, подставляя (2.20) в (2.16) и заменяя сумму по j на интеграл по t, получаем окончательное выражение для топологического члена:

$$S_{\mathrm{WZ}} = \int\limits_0^\beta dt \int\limits_0^1 d\tau \, \mathbf{n}[\partial_\tau \mathbf{n} \times \partial_t \mathbf{n}] \,, \tag{2.21}$$

или, в пространстве Минковского,

$$S_{\mathrm{WZ}} = \int\limits_0^T dx_0 \int\limits_0^1 d\tau \, \mathbf{n}[\partial_\tau \mathbf{n} \times \partial_0 \mathbf{n}] \,. \tag{2.22}$$

2.3 Линейная антиферромагнитная цепочка

В качестве примера применения изложенной выше процедуры получим действие для одномерного гейзенберговского антиферромагнетика с гамильтонианом

$$H = J\sum_i \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} . \tag{2.23}$$

Здесь $J > 0$ – константа обменного взаимодействия ближайших соседей, $\mathbf{S}_i$ – спин, расположенный в i-м узле цепочки, N – полное число узлов.

Каждому спину соответствует вектор $\mathbf{n}_i$ и состояние $|\mathbf{n}_i\rangle$. Для того, чтобы записать действие для всей системы, сделаем в (2.18) замену

$$S_{\text{WZ}} \to \sum_{i=1}^{N} S_{\text{WZ}}(\mathbf{n}_i),$$
$$\langle \mathbf{n}(x_0)|H|\mathbf{n}(x_0)\rangle \to \langle \mathbf{n}_1,\ldots,\mathbf{n}_N|H|\mathbf{n}_1,\ldots,\mathbf{n}_N\rangle. \tag{2.24}$$

Используя свойство (2.9), получим

$$S_{\text{M}} = s\sum_{i=1}^{N} S_{\text{WZ}}(\mathbf{n}_i) + Js^2\int_0^T dx_0 \sum_{i=1}^{N} \mathbf{n}_i(x_0)\mathbf{n}_{i+1}(x_0)\,. \tag{2.25}$$

Предполагая наличие антиферромагнитного порядка, запишем $\mathbf{n}_i$ в виде

$$\mathbf{n}_i = (-1)^i \mathbf{m}_i + a\mathbf{l}_i \equiv (-1)^i \tilde{\mathbf{n}}_i\,. \tag{2.26}$$

Здесь a – постоянная решетки, $\mathbf{m}_i$, $\mathbf{l}_i$ – гладкие функции координаты и времени. В дальнейшем $\mathbf{m}_i$, $\mathbf{l}_i$ будут иметь смысл медленно меняющейся и быстро меняющейся компоненты вектора $\mathbf{n}$: $|\partial \mathbf{m}_i/\partial x_0| << a|\partial \mathbf{l}_i/\partial x_0|$. Выделяя в сумме по i четные и нечетные узлы, перепишем топологическую часть действия:

$$\sum_{i=1}^{N} S_{\text{WZ}}(\mathbf{n}_i) = \sum_{i=1}^{N} (-1)^i S_{\text{WZ}}(\tilde{\mathbf{n}}_i) = \sum_{r=1}^{N/2} \delta S_{\text{WZ}}(\tilde{\mathbf{n}}_{2r-1})\,, \tag{2.27}$$

где

$$\delta S_{\text{WZ}}(\tilde{\mathbf{n}}_{2r-1}) = S_{\text{WZ}}(\tilde{\mathbf{n}}_{2r}) - S_{\text{WZ}}(\tilde{\mathbf{n}}_{2r-1}).$$

Далее, переходя к непрерывному пределу по пространственной координате:

$$\mathbf{m}_i(x_0) \to \mathbf{m}(x_1, x_0)\,, \qquad \mathbf{l}_i(x_0) \to \mathbf{l}(x_1, x_0)$$

и отбрасывая слагаемые порядка a^2, будем иметь

$$S_{\text{M}} = \int d^2x\, L(\mathbf{m},\mathbf{l})\,, \quad d^2x = dx_0 dx_1, \tag{2.28}$$

где

$$L(\mathbf{m},\mathbf{l}) = \frac{s}{2}\mathbf{m}[\partial_0\mathbf{m}\times\partial_1\mathbf{m}] + s\mathbf{l}[\mathbf{m}\times\partial_0\mathbf{m}] + \frac{Js^2a}{2}\left[(\partial_1\mathbf{m})^2 + 4\mathbf{l}^2\right], \tag{2.29}$$

$\partial_0 = \partial/\partial x_0$, $\partial_1 = \partial/\partial x_1$. Наконец, производя в статистическом интеграле суммирование по быстрым компонентам, придем к эффективному действию для линейной антиферромагнитной цепочки в форме Минковского:

$$\exp[iS_{\text{eff}}(\mathbf{m})] = \sum_{\{\mathbf{l}\}} \exp[iS_{\text{M}}(\mathbf{m},\mathbf{l})], \tag{2.30}$$

$$S_{\text{eff}} = sS_{\text{WZ}} + \frac{1}{2}\rho_s \int d^2x \left[(\partial_1 \mathbf{m})^2 - \frac{1}{c^2}(\partial_0 \mathbf{m})^2 \right], \tag{2.31}$$

где $\rho_s = Js^2 a$ – величина, называемая спиновой жесткостью, $c = 2Jsa$ – скорость спиновых волн, S_{WZ} имеет ту же форму, что и топологический член, полученный для отдельного спина (2.22) с точностью до замены $\tau \to x_1$:

$$S_{\text{WZ}} = \frac{1}{2}\int d^2x \mathbf{m}[\partial_0 \mathbf{m} \times \partial_1 \mathbf{m}]. \tag{2.32}$$

Соответствующее выражения в форме Евклида будут иметь вид

$$S_{\text{eff}} = -isS_{\text{WZ}} + \frac{1}{2}\rho_s \int d^2x \left[(\partial_1 \mathbf{m})^2 + \frac{1}{c^2}(\partial_t \mathbf{m})^2 \right], \tag{2.33}$$

$$S_{\text{WZ}} = \frac{1}{2}\int d^2x \mathbf{m}[\partial_t \mathbf{m} \times \partial_1 \mathbf{m}], \tag{2.34}$$

где $d^2x = dtdx_1$. Отметим, что с точностью до величины порядка a^2 вектор $\mathbf{m}$ можно считать единичным.

Нетрудно убедиться, что топологический член представляет собой интеграл по поверхности единичной сферы, так что

$$S_{\text{WZ}} = 2\pi Q, \tag{2.35}$$

где Q может принимать только целые неотрицательные значения и называется топологическим зарядом

Как известно, амплитуда перехода частицы из одной точки пространства-времени в другую описывается функциональным интегралом по траекториям, причем вес каждой траектории в этом интеграле пропорционален $\exp(-S)$. Как видно, для целых спинов топологический член не дает вклада в экспоненту, отличного от +1: $\exp(is2\pi Q) = 1$. Наоборот, для полуцелых спинов этот вклад равен $(-1)^Q = \pm 1$ в зависимости от четности топологического заряда. Таким образом, мы приходим к заключению о фундаментальном различии в поведении одномерных гейзенберговских антиферромагнетиков с целым и полуцелым спином.

Аналогичным образом можно получить действие в форме Евклида или Минковского для двумерной квадратной решетки спинов с гейзенберговским взаимодействием и для решётки произвольной размерности.

3. НЕЛИНЕЙНАЯ СИГМА-МОДЕЛЬ. ДВУМЕРНАЯ КВАДРАТНАЯ РЕШЕТКА

Некоторые вопросы физики низкоразмерных систем удобнее изучать в так называемой нелинейной σ-модели, которая формулируется как теория поля единичного вектора $\mathbf{m}(\mathbf{r},\tau)$, описывающего локальные изменения направления параметра порядка в пространстве и во времени. Используя метод интегрирования по траекториям, можно получить действие и лагранжиан системы, описываемой гейзенберговским гамильтонианом, подобным (2.23). Для двумерной квадратной решётки будем иметь:

$$S = \frac{1}{2g}\int_0^{\beta\Lambda c} d\tau \int d^2 r\left[\left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial \tau}\right)^2 + \left(\nabla \mathbf{m}\right)^2\right], \qquad (3.1)$$

где $d^2r = dx\,dy$, координаты x, y и время τ являются безразмерными величинами, $g = c\Lambda/\rho_s$, Λ – максимальный волновой вектор, $\rho_s = Js^2$ – спиновая жесткость, $c = 2\sqrt{2}Jsa$ – скорость спиновых волн, J – обменный интеграл, s – спиновое число, a – постоянная решетки, $\beta = 1/T$.

Низкотемпературное поведение двумерного гейзенберговского антиферромагнетика может быть исследовано методом ренормализационной группы [3], примененной к системе с действием вида (3.1). Уравнения ренормализационной группы для константы связи g показывают, что при $T = 0$ имеется нетривиальная фиксированная точка $g_c = 4\pi$, которая описывает квантовый переход с критическими показателями классической трехмерной гейзенберговской модели. Таким образом, при нулевой температуре неелевский порядок существует при $g < g_c$, а при $g > g_c$ возникает квантовая разупорядоченная фаза («квантовый парамагнетик»).

Приведем результаты вычисления корреляционной длины для различных типов критического поведения системы. В перенормированном классическом режиме $(g < g_c)$ корреляционная длина экспоненциально расходится при приближении к $T = 0$:

$$\xi \approx 0.9\frac{c}{T}\exp\left[\frac{2\pi Js^2}{T}\left(1-\frac{g}{g_c}\right)\right]. \tag{3.2}$$

В квантовом разупорядоченном режиме $(g > g_c)$ корреляционная длина становится не зависящей от температуры при $T \to 0$ и дается выражением

$$\xi \approx \frac{g}{g_c} - 1. \tag{3.3}$$

И, наконец, при $g = g_c$ (квантовый критический режим) получено

$$\xi \approx \frac{c}{T}. \tag{3.4}$$

4. ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В ДВУМЕРНЫХ МАГНЕТИКАХ

4.1 Классическая сигма-модель

Переход от квантового описания системы к классическому осуществляется заменой $\mathbf{m}(\mathbf{r},\tau)\to\mathbf{m}(\mathbf{r})$ (в фурье-представлении это соответствует исключению флуктуаций с ненулевыми частотами). В этом случае задача сводится к исследованию статистического интеграла $Z=\sum\limits_{\{\mathbf{m}\}}\exp\left(-H/T\right)$, где гамильтониан имеет вид

$$H=\frac{1}{2}\rho_s\int d^2r\,(\nabla\mathbf{m})^2, \tag{4.1}$$

ρ_s – спиновая жесткость, перенормированная квантовыми флуктуациями, $d^2r=dx\,dy$. Устойчивые спиновые конфигурации определяются уравнениями минимума:

$$\delta H=0,\qquad \delta^2H>0, \tag{4.2}$$

где δ и δ^2 – первая и вторая вариации функционала H.

Компоненты вектора $\mathbf{m}$, связанные условием $\mathbf{m}^2=1$, могут быть выражены через два независимых сферических угла:

$$\mathbf{m}=(\sin\theta\cos\varphi,\ \sin\theta\sin\varphi,\ \cos\theta)\,. \tag{4.3}$$

Тогда гамильтониан (4.1) и уравнения (4.2) примут вид

$$H=\frac{1}{2}\rho_s\int d^2r\left[(\nabla\theta)^2+\sin^2\theta\,(\nabla\varphi)^2\right], \tag{4.4}$$

$$\begin{aligned}&\Delta\theta=\sin\theta\cos\theta\,(\nabla\varphi)^2,\\&\nabla(\sin^2\theta\,\nabla\varphi)=0.\end{aligned} \tag{4.5}$$

4.2 XY-модель (вихри)

Эта модель описывает плоскую систему спинов, у которых компонента, перпендикулярная плоскости решетки равна нулю (гамильтониан (4.4) переходит в гамильтониан XY-модели, если положить $\theta=\pi/2$) [4].

Нетривиальные решения уравнений (4.5), называемые вихрями и антивихрями, имеют вид

$$\varphi = n\Phi\,, \tag{4.6}$$

где Φ – полярный угол, *n* принимает целые значения и называется зарядом вихря. Можно показать, что энергия единичного вихря и антивихря равна бесконечности, а конечную энергию имеет система вихрей с суммарным зарядом, равным нулю. Устойчивость системы вихрей, задаваемая условием $\delta^2 H > 0,$ проверяется тривиальным образом.

4.3 Модель Гейзенберга (скирмионы)

Простейшие решения уравнений (4.5) для модели Гейзенберга, называемые скирмионами и антискирмионами, или топологическими возбуждениями, могут быть записаны в форме

$$\tan\left(\theta/2\right) = \left(r/r_0\right)^Q, \qquad \varphi = Q\Phi, \tag{4.7}$$

где r, Φ – полярные координаты, r_0 – постоянная, называемая размером скирмиона, Q – целое число, называемое топологическим зарядом. В отличие от вихрей XY-модели, энергия единичного скирмиона конечна и равна

$$E = 4\pi\rho_s Q\,. \tag{4.8}$$

Решения системы (4.5), соответствующие произвольному числу скирмионов и антискирмионов, были получены Белавиным и Поляковым [5] в следующем виде.

$$\tan(\theta/2)\exp(i\varphi) = \frac{P_{Q_1}(z)}{R_{Q_2}(z)}, \tag{4.9}$$

где $z = x + iy,$ $P_{Q_1}(z),$ $R_{Q_2}(z)$ – любые полиномы степени Q_1, Q_2, соответственно.

Решения (4.9) могут быть представлены как непрерывное отображение бесконечной плоскости на сферу единичного радиуса с топологическим зарядом Q, равным наибольшему из значений Q_1, Q_2. Простейшие конфигурации, соответствующие $Q = 1,$ впервые полученные Скирме [6], были названы скирмион и антискирмион.

Уравнения (4.5) представляют собой, вообще говоря, условие экстремальности функционала энергии (4.4). Для того, чтобы соответствующие состояния были устойчивыми, то есть соответствовали минимуму функционала, необходима положительная определенность второй вариации H вблизи экстремальных решений.

Спиновые конфигурации вблизи экстремальных состояний можно записать следующим образом:

$$\theta = \theta_0 + \theta_1, \qquad \varphi = \varphi_0 + \varphi_1. \tag{4.10}$$

где θ_0, φ_0 – решения, удовлетворяющие (4.9), θ_1, φ_1 – малые отклонения от этих состояний. С точностью до квадратичных по θ_1, φ_1 членов гамильтониан (4.4) принимает вид:

$$H = \varepsilon_0 Q + \frac{1}{2}\rho_s \int d^2x\, a^* \hat{F} a, \tag{4.11}$$

где $\varepsilon_0 = 4\pi\rho_s$, $\hat{F} = -\nabla^2 + 2i\cos\theta_0 \nabla\varphi_0 \nabla + (\nabla\varphi_0)^2 \cos 2\theta_0$, $a = \theta_1 - i\varphi_1 \sin\theta_0$.

Как видно, условие положительной определенности второй вариации функционала энергии эквивалентно положительности спектра собственных значений оператора $\hat{F}$, или энергии элементарных возбуждений над скирмионным состоянием. Для исследования второго слагаемого в выражении (4.11) удобно перейти от интегрирования по бесконечной плоскости к Q-кратному интегрированию по единичной сфере. Замечая, что

$$d^2x = \left| \frac{\partial(x,y)}{\partial(\theta_0,\varphi_0)} \right| d\theta_0 d\varphi_0 = \frac{d\Omega}{(\nabla\varphi_0)^2 \sin^2\theta_0}, \qquad d\Omega = \sin\theta_0 d\theta_0 d\varphi_0 \tag{4.12}$$

перепишем (4.11) в следующей форме:

$$\begin{gathered} H = \varepsilon_0 Q + \frac{1}{2}\rho_s \int\limits_{(Q)} d\Omega\, a^* \hat{G} a, \\ \hat{G} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) - \frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + 2i\cos\theta\frac{\partial}{\partial\varphi} + \cos 2\theta\right). \end{gathered} \tag{4.13}$$

Здесь и далее опускаем значок 0 в переменных θ_0,φ_0.

Спектр собственных значений $\hat{G}$ легко получить, введя, по определению, операторы $\hat{J}_+$, $\hat{J}_-$, $\hat{J}_z$:

$$
\begin{aligned}
&\hat{J}_{+} = \exp(i\varphi)\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{\sin\theta}\right),\\
&\hat{J}_{-} = \exp(-i\varphi)\left(-\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{\sin\theta}\right),\\
&\hat{J}_{z} = -i\frac{\partial}{\partial\varphi}.
\end{aligned}
\tag{4.14}
$$

Нетрудно убедиться, что $\hat{J}_{+}$, $\hat{J}_{-}$, $\hat{J}_{z}$ удовлетворяют перестановочным соотношениям для компонент момента импульса, а оператор $\hat{G}$ может быть представлен в виде

$$
\hat{G} = \frac{1}{2}\left(\hat{J}_{+}\hat{J}_{-} + \hat{J}_{-}\hat{J}_{+}\right) + \hat{J}_{z}^{2} - 2 = \hat{\mathbf{J}}^{2} - 2\,. \tag{4.15}
$$

Таким образом, задача о нахождении спектра элементарных возбуждений над скирмионным состоянием сводится к задаче о собственных функциях и собственных значениях квадрата момента импульса.

Раскладывая a по собственным функциям квадрата момента

$$
\begin{aligned}
&a(\Omega) = \sum_{JM} a_{JM}\psi_{JM}(\Omega),\\
&\mathbf{J}^{2}\psi_{JM} = J(J+1)\psi_{JM},\\
&\Omega = (\theta,\varphi),
\end{aligned}
\tag{4.16}
$$

получим гамильтониан системы невзаимодействующих пространственных ротаторов:

$$
\begin{aligned}
&H = \varepsilon_0 Q + \sum_{J=1}^{\infty}\sum_{M=-J}^{J} E_J\left|a_{JM}\right|^{2},\\
&E_J = \frac{1}{2}\rho_s\left[J(J+1) - 2\right].
\end{aligned}
\tag{4.17}
$$

Отсутствие решения с $J = 0$ непосредственно следует из определения $\hat{J}_{+}, \hat{J}_{-}, \hat{J}_{z}$ по формулам (4.14). Минимальное значение E_J, равное 0, соответствует $J = 1$, следовательно, скирмионные конфигурации представляют собой устойчивые состояния.

Следует отметить, что полученные результаты становятся неверными в случае квантового гейзенберговского магнетика. Действительно, решая задачу об элементарных возбуждениях вблизи неоднородных собственных состояний гейзенберговского спинового гамильтониана, мы получим гамильтониан, имеющий вид (4.11), в котором a^*, a должны быть заменены на операторы рождения и уничтожения бозонов a^+, a:

$$\left[a(\mathbf{r}), a^+(\mathbf{r}')\right] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Дальнейший переход от интегрирования по плоскости к интегрированию по сфере дает выражение, аналогичное (4.17)

$$H = \varepsilon_0 Q + \sum_{J=1}^{\infty} \sum_{M=-J}^{J} E_J a_{JM}^+ a_{JM} . \tag{4.18}$$

Однако, операторы a_{JM}, a_{JM}^+ уже не удовлетворяют перестановочным соотношениям для бозонов, и вопрос о диагонализации гамильтониана (4.18) остается открытым.

5. ФРУСТРИРОВАННЫЕ ДВУМЕРНЫЕ АНТИФЕРРОМАГНЕТИКИ

Фрустрированными называются системы с неупорядоченным основным состоянием. Долгое время считалось, что двумерный квантовый антиферромагнетик с взаимодействием ближайших соседних спинов $s = 1/2$ при нулевой температуре имеет дальний порядок (неелевское основное состояние). Однако, ни одно из проведенных исследований не является строгим, и вопрос об основном состоянии двумерного антиферромагнетика со спином 1/2 остается открытым. В этом разделе рассматривается теория, в которой основное состояние данной системы является фрустрированным.

5.1 Гипотеза об РВС-состояниях

Предполагается, что каждая пара соседних спинов на плоской решетке находится по отношению друг к другу в синглетном состоянии, при этом комбинирование соседних спинов в пары все время меняется. Такое состояние, представляющее суперпозицию по всем реализациям синглетных пар, было названо термином, заимствованным из квантовой химии, – состоянием с «резонирующими валентными связями» (РВС).

Рассмотрим гамильтониан Хаббарда вблизи половинного заполнения зоны $(N_e / N = n \approx 1)$ и в пределе $U >> t$. Исключая методом канонического преобразования состояния с двукратным заполнением узлов $\left|\uparrow\downarrow\right\rangle$, получаем эффективный гамильтониан, действующий в пространстве однократно заполненных узлов.

$$H_{\text{eff}} = -t \sum_{<ij>,\,\sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) c^{+}_{i\sigma} c_{j\sigma} (1 - n_{j,-\sigma}) + J \sum_{<ij>} (\mathbf{S}_i \mathbf{S}_j - \tfrac{1}{4} n_i n_j) - \mu \sum_{i,\,\sigma} n_{i\sigma}, \qquad (5.1)$$

где

$$S_i^+ = c^{+}_{i\uparrow} c_{i\downarrow}, \qquad S_i^- = c^{+}_{i\downarrow} c_{i\uparrow}, \qquad S_i^z = \tfrac{1}{2}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}) \qquad (5.2)$$

являются операторами спина, $n_i = n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$, μ – химический потенциал, $J = 4t^2 / U$ – обменный параметр эффективного антиферромагнитного взаимодействия, <*ij*> означает суммирование по парам ближайших соседей.

Введем оператор рождения синглетной пары на узлах i, j:

$$b_{ij}^{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{i\uparrow}^{+}c_{j\downarrow}^{+} - c_{i\downarrow}^{+}c_{j\uparrow}^{+}) . \tag{5.3}$$

В терминах этих операторов гамильтониан (5.1) перепишется в виде двух членов, описывающих кинетическую энергию электронов в почти заполненной нижней зоне Хаббарда и энергию взаимодействия синглетных пар:

$$H_{\text{eff}} = -t\sum_{<ij>,\sigma}(1-n_{i,-\sigma})c_{i\sigma}^{+}c_{j\sigma}(1-n_{j,-\sigma}) - J\sum_{<ij>}b_{ij}^{+}b_{ij} - \mu\sum_{i,\sigma}n_{i\sigma}. \tag{5.4}$$

5.2 Приближение среднего поля

Простейшим подходом к исследованию гамильтониана (5.4) является приближение среднего поля, позволяющее найти параметр порядка и энергию элементарных возбуждений.

Определим параметр порядка в виде статистического среднего от оператора рождения синглетной пары:

$$\Delta_{ij}^{*} = < b_{ij}^{+} > . \tag{5.5}$$

В приближении среднего поля гамильтониан представляется в виде

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k},\sigma}(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)c_{\mathbf{k}\sigma}^{+}c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k},\sigma}(\Delta_{\mathbf{k}}c_{\mathbf{k}\uparrow}^{+}c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{+} + \Delta_{\mathbf{k}}^{*}c_{-\mathbf{k}\downarrow}c_{\mathbf{k}\uparrow}), \tag{5.6}$$

где

$$\begin{gathered}\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{q}}V_{\mathbf{kq}} < c_{-\mathbf{q}\downarrow}c_{\mathbf{k}\uparrow} >, \\ V_{\mathbf{kq}} = J\left\{\cos[(k_x - q_x)a] + \cos[(k_y - q_y)a]\right\}, \\ \varepsilon_{\mathbf{k}} = -t\delta\left\{\cos(k_x a) + \cos(k_y a)\right\}.\end{gathered} \tag{5.7}$$

Величина $\delta = 1 - n$ описывает отклонение от половинного заполнения. В результате стандартной процедуры диагонализации квадратичной формы получаем энергию квазичастиц и уравнения на параметр порядка и химический потенциал:

$$E_{\mathbf{k}} = \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + \left|\Delta_{\mathbf{k}}\right|^2} , \tag{5.8}$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{q}}V_{\mathbf{kq}}\frac{\Delta_{\mathbf{q}}}{2E_{\mathbf{q}}}\tanh\left(\frac{E_{\mathbf{q}}}{2T}\right), \tag{5.9}$$

$$\delta = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \tanh\left(\frac{E_{\mathbf{k}}}{2T} \right). \tag{5.10}$$

Следует отметить, что, принимая гипотезу об основном состоянии как о состоянии с РВС, фрустрация в исходном гамильтониане явно не учитывается. Таким образом, в теории произведен только частичный учет фрустрации, а именно лишь в самой возможности существования основного состояния с РВС. Однако, даже такой упрощенный подход дает возможность получить многие принципиально новые результаты.

ЛИТЕРАТУРА

1. Изюмов Ю.А., Кацнельсон М.И., Скрябин Ю.Н. Магнетизм коллективизированных электронов. М.: Физматлит, 1994. 368 с.
2. Fradkin E. Field Theories of Condensed Matter Systems. Addison-Wesley, 1991.
3. Chakravarty S., Halperin B.I., Nelson D.R. Phys. Rev. B, vol. 39, p. 2344, 1989.
4. Minnhagen P. Reviews of Modern Physics, vol. 59, p. 1001, 1987.
5. Белавин А.А., Поляков А.М. Письма в ЖЭТФ, т. 22, вып. 10, с. 503-506, 1975.
6. Skyrme T. Proc. Roy. Soc. London, Ser. A247, p. 260-278, 1958.

Белов Сергей Иванович
Кутузов Александр Сергеевич

ТЕОРИЯ СИЛЬНОКОРРЕЛИРОВАННЫХ СИСТЕМ

2015